



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Efeitos térmicos e de irradiação em filmes finos de Au
Autor	MAURÍCIO JESUÍNO NOGUEIRA
Orientador	PAULO FERNANDO PAPALEO FICHTNER

Nano-objetos estão sendo cada vez mais aplicados em dispositivos e processos tecnológicos. Suas propriedades físicas e químicas, bem como sua estabilidade frente a modificações estruturais e morfológicas dependem do tamanho. A retração de borda de filmes finos (i.e. *dewetting*) é um caso típico de instabilidade morfológica dependente da espessura do filme. O processo de *dewetting* é controlado por átomos de superfície e se desencadeia com o aumento de mobilidade atômica induzida, por exemplo, por via térmica ou por irradiação. Neste trabalho foram estudados os efeitos da irradiação de elétrons em filmes finos de Au com base em simulações de dinâmica molecular. As simulações foram feitas com o *software* LAMMPS. Como o material estudado é um metal de estrutura cúbica de face centrada (FCC), o potencial interatômico que melhor representa a interação entre os átomos da estrutura é baseado em um modelo de átomos embebidos (EAM). A simulação pode ser dividida em dois momentos, primeiramente foi feita uma passagem de tempo para que a estrutura chegasse no estado de equilíbrio. Num segundo momento, foram simuladas as colisões, onde foram considerados elétrons impingindo a diferentes direções em relação a normal de planos cristalinos. Além disso também consideramos o estado de amplitude de oscilação e a posição relativa do átomo no plano frente a arestas e vértices. Os resultados mostram que, diferentemente das aproximações usuais da literatura (bordas arredondadas), é importante considerar arestas e vértices decorrentes do facetamento de nano-objetos a baixas temperaturas. Os átomos localizados próximos a arestas e vértices se deslocam com menor transferência de energia do que os átomos em posições centrais numa faceta. Além disso, demonstramos que a probabilidade de deslocamento de um átomo depende de seu estado de amplitude de vibração, sendo maior em estados de amplitude máxima para “fora” da superfície.